

Simulation par méthode de Monte-Carlo

Prof. Mohamed El Merouani

Université Abdelmalek Essaâdi
Faculté des Sciences de Tétouan
Département de Mathématiques

2018/2019

- Introduction
- Intégration unidimensionnelle
- Intégrale multiple
- Intégration par simulation de Monte-Carlo
- Exemple de calcul d'intégral par la méthode de Monte-Carlo

- La méthode de Monte-Carlo peut être définie comme toute technique numérique de résolution de problèmes où on utilise des nombres aléatoires.
- La méthode de Monte-Carlo a été développée vers 1949, lors du projet Manhattan (naissance de la bombe atomique).
- Les pionniers des méthodes Monte-Carlo sont, entre autres, E. Fermi, J. Neumann, S. Ulam et N. Metropolis.
- Ce n'est toute fois qu'avec l'avènement des ordinateurs que l'on a pu réellement utiliser cette méthode.
- Quant au nom de Monte-Carlo, on le doit bien sûr à la capitale de la province de Monaco, qui est connue par ses casinos des jeux de hasard.

- L'expression "*Simulation de Monte-Carlo*" recouvre une série de techniques destinés à résoudre des problèmes complexes mais le plus souvent déterministes par l'introduction d'échantillonnage aléatoires.
- On a recoure à une simulation de Monte-Carlo lorsque le problème :
 - Est trop complexe pour qu'une résolution par voie purement mathématique soit envisageable.
 - Est trop volumineux (en particulier, contient un trop grand nombre de variables) pour que les techniques d'approximation numérique puissent conduire à un résultat précis dans un temps acceptable.
- Ce genre de situation est très commun dans tous les domaines ayant recours aux mathématiques appliquées : physique, chimie, biologie, économie, finance, sociologie, etc...

- A titre d'exemple, nous décrivons ici une des applications les plus simples de simulation de Monte-Carlo : L'intégration d'une fonction dans une région bornée. Comment calculer l'intégrale entre a et b d'une fonction g ? (i.e. $I = \int_a^b g(x)dx$).
- En notant qu'une probabilité, une espérance mathématique, une variance ainsi que tout autre moment s'expriment comme des intégrales, on comprend l'importance pratique de la méthode de Monte-Carlo dans les applications statistiques et probabilistes.

Les méthodes de Monte-Carlo reposent sur une approximation probabiliste et non déterministe. En ce sens, on ne résout pas l'objet mathématique mais on cherche à l'approcher moyennant la loi forte des grands nombres. Cet objet peut être une intégrale comme c'est le cas ici. Nous traitons, les intégrales se présentant sous la forme :

$$I = \int_a^b g(x)dx,$$

où g est une fonction intégrable sur $[a, b]$.

La méthode de Monte-Carlo pour l'intégration consiste à trouver une v.a. Z telle que : $I = E(Z)$. Ce qui permet d'estimer I en utilisant la loi forte des grands nombre. L'erreur commise est contrôlée par le théorème central limite dès que Z est de carré intégrable.

Si cette primitive de $g(x)$ n'est connue, l'intégrale ne peut pas être calculée analytiquement. Mais si $g(x)$ peut être facilement calculée en tout point de l'intervalle $[a, b]$, on peut obtenir une bonne approximation de la valeur de cette intégrale par des méthodes numériques.

Il existe de nombreuses méthodes d'intégration numérique. La plus simple consiste à diviser l'intervalle $[a, b]$ par n rectangles adjacents. La hauteur de chaque rectangle est égale à la valeur de $g(x)$ pour x pris au milieu de la base du rectangle. La somme des aires de ces rectangles est une approximation de l'aire sous la courbe représentant $g(x)$,

c'est-à-dire l'intégrale I recherchée :

$$I \simeq \sum_{i=1}^n hg(x_i) = h \sum_{i=1}^n g(x_i) = \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n g(x_i).$$

Si $g(x)$ a un comportement suffisamment régulier, et si les rectangles sont suffisamment étroits, alors l'aire ainsi calculée sera une bonne approximation de la valeur de l'intégrale.

Proposition 1 :

On écrit :

$$I = \int_a^b \frac{g(x)}{f_X(x)} f_X(x) dx = E \left(\frac{g(X)}{f_X(X)} \right)$$

où X est une v.a. de densité f_X et on note que $\frac{g(X)}{f_X(X)} = Z$ est bien définie car $f_X(X) \neq 0$ presque sûrement. Par ailleurs Z est dans $L^1(a, b)$, donc, d'après la loi forte des grands nombres :

$$\hat{I}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{g(X_i)}{f_X(X_i)} \xrightarrow{p.s.} I, \quad \text{quand } n \rightarrow \infty$$

\hat{I}_n est un estimateur sans biais de I si les X_i sont indépendantes de densité f_X . où les X_i sont n réalisations de la v.a. X ayant f_X pour densité de probabilité.

Il convient, cependant, de noter que dans les applications, on dispose rarement d'un échantillon de n réalisations de la v.a. X . À la place et par application des méthodes de génération de v.a. présentées dans les séances antérieures, on peut disposer de n valeurs simulés de X .

Ces valeurs peuvent alors remplacer les vraies réalisations dans la formule d'approximation. L'erreur commise par ce remplacement ne devrait être à priori importante surtout lorsque le générateur utilisé est de bonne qualité. Ainsi, en pratique, on cherche à approximer I par $\hat{I}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{g(X_i)}{f_X(X_i)}$ où les X_i sont n valeurs simulées d'une v.a. X ayant f_X pour densité de probabilité.

La quantité \hat{I}_n est appelée l'approximation de I par la méthode de Monte-Carlo.

On peut calculer l'approximation de Monte-Carlo en utilisant l'algorithme suivant :

- Générer (en utilisant un générateur de bonne qualité) n nombres aléatoires (valeurs simulées d'une v.a. suivant la loi uniforme continue sur $[0, 1]$) : U_1, U_2, \dots, U_n
- Choisir une densité f_X définie sur le support Δ (et facile à simuler par exemple par la méthode d'inversion) pour simuler à partir des U_i n valeurs d'une variable X : X_1, X_2, \dots, X_n .
- Déterminer les quantités : $\frac{g(X_1)}{f_X(X_1)}, \dots, \frac{g(X_n)}{f_X(X_n)}$
- Calculer la moyenne arithmétique de ces quantités donnant \hat{I}_n .

Remarque :

L'approximation Monte-Carlo n'est pas unique.

En effet,

on peut aussi écrire $I = E \left(\frac{g(X)}{f_X^*(X)} \right)$ et f_X^* une autre densité de probabilité ayant pour support Δ et donc $\hat{I}_n^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{g(X_i)}{f_X^*(X_i)}$ définit une autre approximation Monte-Carlo de I . En fait, il y a autant d'approximations que de densités de probabilité sur le support Δ . En pratique, on choisit la densité la plus facile à simuler.

Intégration unidimensionnelle :

Exemple :

Soit à approximer par la méthode de Monte-Carlo l'intégrale suivante :

$$I = \int_0^2 e^{-x^2} dx$$

Il convient au préalable d'écrire I comme une espérance mathématique en se donnant une densité de probabilité f sur $[0, 2]$ facile à simuler. On choisit pour cet exemple la densité de la loi uniforme continue sur $[0, 2]$ qui est la plus simple, soit : $f(x) = \frac{1}{2}\mathbb{I}_{[0,2]}$. D'où, on déduit directement :

$$I = \int_0^2 2e^{-x^2} \frac{1}{2} dx$$

Soit,

$$I = E\left(2e^{-X^2}\right) \quad \text{où } X \sim \mathcal{U}(0, 2)$$

et donc

$$\hat{I}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 2e^{-X_i^2}$$

Intégration unidimensionnelle :

Exemple :

les X_i étant des valeurs simulées de $X \sim \mathcal{U}(0, 2)$, \hat{I}_n définit l'approximation de I par la méthode de Monte-Carlo. En conséquence pour trouver cette approximation, on peut procéder comme suit (n étant donnée) :

- Générer n valeurs indépendantes $U_1, U_2, \dots, U_n \sim \mathcal{U}(0, 1)$
- Calculer X_1, X_2, \dots, X_n par la méthode d'inversion, soit $X_i = 2U_i$.
- Calculer $g(X_i) = 2e^{-X_i^2}$ pour $i = 1$ à n et leur moyenne arithmétique simple pour trouver \hat{I}_n .

Intégration unidimensionnelle :

Propriétés :

On peut considérer \hat{I}_n comme un estimateur calculé sur l'échantillon de variables X_1, X_2, \dots, X_n qui est un échantillon i.i.d qu'on suppose posséder une espérance mathématique m et une variance σ^2 . On peut alors chercher si \hat{I}_n possède les propriétés classiques d'un estimateur. Au préalable, on donne l'expression de la variance de \hat{I}_n dont l'estimation fournit une mesure de la précision de cette approximation.

Précision de \hat{I}_n :

Par définition, on a :

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{I}_n) &= \text{Var} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{g(X_i)}{f(X_i)} \right) \\ &= \text{Var} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \right) \quad \text{avec} \quad h(X_i) = \frac{g(X_i)}{f(X_i)} \end{aligned}$$

Intégration unidimensionnelle :

Propriétés :

Comme les $h(X_i)$ sont i.i.d., il s'ensuit que :

$$\text{Var}(\hat{I}_n) = \frac{1}{n} \text{Var}(h(X))$$

$$\text{ou encore } \text{Var}(\hat{I}_n) = \frac{1}{n} E(h^2(X)) - E^2(h(X))$$

$$\text{Soit enfin : } \text{Var}(\hat{I}_n) = \frac{1}{n} E(h^2(X)) - I^2$$

Cette quantité dépendant de I ne peut pas être donc déterminée. On peut cependant l'approximer. En effet, on peut approximer I^2 par \hat{I}_n^2 . Quant à $J = E(h^2(X))$, on peut, comme on l'a fait pour $I = E(h(X))$, utiliser la méthode de Monte-Carlo pour l'approximer, soit $\hat{J}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h^2(X_i)$, où les X_i sont des valeurs simulées de X selon f .

Intégration unidimensionnelle :

Propriétés :

Une approximation de $Var(\hat{I}_n)$ peut être aussi donnée par :

$$\widehat{Var}(\hat{I}_n) = \frac{1}{n} \left(\hat{J}_n - \hat{I}_n^2 \right)$$

qui fournit une estimation de la précision de l'approximation de la méthode de Monte-Carlo.

Absence de biais :

L'estimateur \hat{I}_n est sans biais. En effet :

$$E(\hat{I}_n) = E \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \right)$$

soit, compte tenu des propriétés de l'opérateur "espérance",

$$E(\hat{I}_n) = E \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{n} h(X_i) \right)$$

Intégration unidimensionnelle :

Propriétés :

Comme les X_i sont indépendantes et de même loi, les $h(X_i)$ le sont aussi, d'où

$$E(\hat{I}_n) = E(h(X)) = I$$

où X est une v.a. de même loi que les X_i prouvant ainsi que \hat{I}_n est un estimateur sans biais de I .

Convergence :

L'estimateur \hat{I}_n est par construction convergent en probabilité. En effet, étant construit à partir de la loi des grands nombres, l'on a aussi :

$$P(\lim \hat{I}_n) = I$$

On note aussi, qu'il est convergent en moyenne quadratique. L'on a, en effet, à la fois $E(\hat{I}_n) = I$ et $Var(\hat{I}_n) \rightarrow 0$

Intégration unidimensionnelle :

Propriétés :

Normalité asymptotique :

L'estimateur \hat{I}_n se présente comme une moyenne arithmétique. On sait alors d'après le théorème central limite, que

$$\frac{\hat{I}_n - I}{\sigma/\sqrt{n}} \quad \text{où} \quad \sigma^2 = \text{Var}(h(X))$$

converge en loi vers la loi normale centrée réduite. A noter en outre que cette proposition reste vraie en changeant σ^2 par $\hat{\sigma}^2 = \widehat{\text{Var}}(h(X))$. On peut en conséquence énoncer que :

$$\frac{\hat{I}_n - I}{\hat{\sigma}/\sqrt{n}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

Proposition 2 :

On a :

$$\frac{(\hat{I}_n - I)}{\sigma/\sqrt{n}} \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1), \quad \text{quand } n \rightarrow \infty$$

avec $\sigma^2 < \infty$ est la variance de Z .

ce qui permet de définir un intervalle de confiance (asymptotique) de I de niveau égal à $(1 - \alpha)\%$:

$$\left[\hat{I}_n - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}}, \hat{I}_n + z_{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \right]$$

En effet, on a :

$$P \left(\hat{I}_n - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \leq I \leq \hat{I}_n + z_{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \right) \approx 1 - \alpha$$

où z_a désigne le quantile d'ordre a de la loi normale centrée réduite.

Remarque :

Si F est la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite, z_α représente le quantile d'ordre α , i.e. tel que $F(z_\alpha) = 1 - \alpha$. De la proposition précédente, on peut établir un intervalle de confiance I :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left(\hat{I}_n - z_{\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \leq I \leq \hat{I}_n + z_{1-\frac{\alpha}{2}} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \right) = 1 - \alpha,$$

$\hat{\sigma}_n^2$ un estimateur sans biais de la variance de Z :

$$\hat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(\frac{g(X_i)}{f_X(X_i)} - \hat{I}_n \right)^2$$

Vitesse de convergence :

La méthode de Monte-Carlo présente une vitesse de convergence relativement lente. En effet, du fait de la normalité asymptotique, on a :

$$|\hat{I}_n - I| < z_{1-(\frac{\alpha}{2})}\sigma/\sqrt{n}$$

avec une probabilité égale à $(1 - \alpha)$. La quantité $z_{1-(\frac{\alpha}{2})}\sigma/\sqrt{n}$ définit ainsi l'erreur d'approximation maximale de la méthode de Monte-Carlo. Cette erreur converge vers 0 quand n tend vers l'infini. Cette convergence est, cependant, assez lente, de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{n}}$, puisque par exemple en multipliant le nombre d'observations par 100, l'erreur maximale d'approximation se trouve seulement divisée par 10.

Intégrale multiple :

Que se passe-t-il si nous utilisons la même approche dans le cas d'une intégrale multiple ?

Nous rencontrons deux difficultés :

- 1 D'abord, la région d'intégration n'est plus définie par une paire de nombres comme précédemment, mais par une hyper-surface fermée dont la forme peut être très compliquée même pour des problèmes simples, et impossible de décrire analytiquement.
- 2 La deuxième difficulté est encore plus grave. Revenons un instant à l'intégrale simple, et supposons que nous ayons décidé d'utiliser 500 rectangles. Puis envisageons une intégrale multiple à 500 variables, et décidons de conserver sur chaque axe la même résolution que dans le cas de l'intégrale simple. Nous devons alors définir 500×500 hyper-rectangles, un nombre au-delà des capacités des ordinateurs les plus rapides.

Intégrale multiple :

Cette difficulté est absolument universelle, et se retrouve dans toute technique locale, qu'elle soit déterministe ou probabiliste. Notez que le nombre de rectangles est choisi essentiellement sur la base des considérations portant sur la rapidité avec laquelle la fonction varie dans la région d'intégration. Il n'est donc pas possible de réduire arbitrairement le nombre de rectangles jusqu'à une valeur compatible avec des temps de calcul raisonnables, sous peine de perdre tellement d'information sur la fonction que l'approximation obtenue devienne grossièrement fautive.

C'est alors qu'intervient une idée à la fois simple et efficace. Nous avons remarqué qu'une intégrale n'est, à peu de chose près, que la somme des valeurs de la fonction prises sur des points régulièrement répartis dans la région d'intégration. Dans cette phrase, remplaçons "**régulièrement répartis**" par "**répartis selon une distribution de probabilité uniforme**", et nous avons notre première simulation de Monte-Carlo.

Intégration par simulation de Monte-Carlo :

Donc, dans sa version la plus simple, le calcul d'une intégrale sous la forme :

$$I = \int \int \int \cdots \int_{\text{région}} f(x_1, \cdots, x_p) dx_1 \cdots dx_p,$$

par simulation de Monte-Carlo procède ainsi :

- 1 Se servir d'une distribution uniforme à p dimensions pour tirer n points dans la région d'intégration (dont nous notons le volume V).
- 2 Additionner tous les $f(p_i)$, multiplier le résultat par V/n .
- 3 Le résultat est une estimation de la valeur de l'intégrale I :

$$I = \frac{V}{n} \sum_{i=1}^n f(p_i).$$

Remarque :

L'intérêt principal de l'intégration par simulation de Monte-Carlo réside dans son comportement en grande dimension. Cette question est difficile mais la réponse est simple. Considérons une méthode quelconque d'intégration numérique déterministe reposant sur le calcul de valeurs de la fonction sur les noeuds d'une grille dans la région d'intégration. Si nous comparons les performances de cette méthode et de celle de la méthode de Monte-Carlo pour des dimensions de plus en plus grandes, il se trouvera une dimension d au-delà de laquelle la méthode de Monte-Carlo sera plus efficace que la méthode déterministe pour un nombre n donné de tirages. Ceci veut-dire que les valeurs de l'intégrale trouvées par la méthode de Monte-Carlo seront, le plus souvent, plus proches de la valeur vraie de l'intégrale que celle trouvée par l'approximation déterministe.

Exemple de calcul d'intégral par la méthode de Monte-Carlo :

Pour calculer l'intégral :

$$I = \int_2^{12} \exp(-(x^2 + x)/3) \sin(x) dx,$$

on note

$$\Psi(x) = \exp(-(x^2 + x)/3) \sin(x)$$

Pour l'écriture, on utilise le syntax "function" du langage R comme suit :

```
le nom de la fonction <- fonction(liste des arguments) {le corps de la fonction}
```

1) Le code de R ci-dessous :

```
#L'écriture de la fonction :  $\Psi(x)$ .
```

```
psi=function(x){exp(-(x^2+x)/3)*sin(x)} #Est ce qu'elle fonctionne?
```

```
psi(0); psi(-3); psi(pi/2)
```

Exemple de calcul d'intégral par la méthode de Monte-Carlo :

2) Exécution dans le console R :

```
>psi=function(x){exp(-(x^2+x)/3)*sin(x)} #Est ce qu'elle  
fonctionne?
```

```
>psi(0); psi(-3); psi(pi/2)
```

```
[1] 0
```

```
[1] -0.01909852
```

```
[1] 0.2602622
```

-Il faut charger le package qui contient le syntaxe utilisé et ça par deux méthodes.

- La 1^{ère} : on clique sur "packages" ensuite "charger package" puis sélectionne le nom de package puis sur "OK".
- La 2^{ème} : est plus simple, on écrit dans le console R : library (le nom de package).

Exemple de calcul d'intégral par la méthode de Monte-Carlo :

-Utilisation de syntaxe "integrate" : Il faut charger le package "stats" pour utiliser le syntaxe "integrate". On utilise le syntaxe "integrate" du langage R sous forme :

```
le nom d'integrale<-integrate(le nom de la fonction, la
borne inferieure d'integrale, la borne superieure
d'integrale)
```

Le programme R

```
### Simulation par methode de Monte-Carlo
# Integration par simulation de Monte-Carlo
psi=function(x){exp(-(x^2+x)/3)*sin(x)}
library(stats) # charger le package "stats"
I=integrate(psi,2,12)$v
psi2=function(x){(exp(-(x^2+x)/3)*sin(x))^2}
J=integrate(psi2,2,12)$v
var=10*J-I^2
```

Exemple de calcul d'intégral par la méthode de Monte-Carlo :

```
## Loi Forte des Gr Nbr
N=1000
In=numeric(N)
Zn=numeric(N)
for(k in 1:N){
v=runif(k,2,12)
In[k]=10*mean(psi(v))
Zn[k]=(In[k]-I)/sqrt(var/k)
}
N=1:1000
plot(N,In,type='b',xlab="N",ylab=expression(I_N),main="L.F.G.NB")
abline(h=I,lwd=3,col=2)
## T C L
```

Exemple de calcul d'intégral par la méthode de Monte-Carlo :

```
for(j in 1:N){}
x11()
qqnorm(Zn,xlab="Q.Norm",ylab="Q.Theo",main="QQ-plot")
qqline(Zn)
x11()
hist(Zn,50,prob=TRUE,xlab="x",ylab="f(x)",main="histogramme")
x=rnorm(length(Zn))
lines(density(x),col=4,lwd=2)
lines(density(Zn),col=2,lwd=2,lty=2)
legend(1,.4,c("densite Theorique","densite Empirique"),
col=c(4,2), lty=c(1,2), lwd=c(2,2), bty="n",cex=1.3)
```


Approximation du nombre π par la méthode de Monte-Carlo :

Nous proposons de donner une estimation de nombre π à l'aide de simulations. L'idée (parmi d'autres) : on simule n observations selon une loi uniforme sur le pavé $[0,1] \times [0,1]$ et on compte la proportion d'observations qui sont à l'intérieur du disque unité. On utilise, donc, l'approximation d'intégrales par génération de nombres aléatoires qui est un exemple de la simulation Monte-Carlo.

Si $X \sim \mathcal{U}[0, 1]$ et $Y \sim \mathcal{U}[0, 1]$ deux v.a. indépendantes, alors $(X, Y) \sim \mathcal{U}([0, 1] \times [0, 1])$ et, $P((X, Y) \in [a, b] \times [a, b]) = \int_a^b \int_c^d dx dy$.
Par conséquent,

$$P(X^2 + Y^2 < 1) = \int \int_{\{X^2+Y^2<1, X \geq 0, Y \geq 0\}} dx dy = \frac{\pi}{4}$$

Donc la probabilité de "tomber" dans un quart de disque de centre $O(0, 0)$ et de rayon 1 est $\frac{\pi}{4}$.

Approximation du nombre π par la méthode de Monte-Carlo :

Le programme R

```
# Génération de  $n$  ( $n = 2000$ ) réalisations d'une loi uniforme
sur  $[0, 1] \times [0, 1]$ 
> n=2000
> XY.mat=matrix(runif(2*n),ncol=2)
# Calcul de la proportion d'observations dans le quart de
disque
> est.prop=mean(XY.mat[,1]^2+XY.mat[,2]^2<1)
#Estimation de  $\pi$ 
> est.pi=4*est.prop
> est.pi
[1] 3.132
```

Approximation du nombre π par la méthode de Monte-Carlo :

```
# Representation graphique de notre echantillon a l'aide de  
la fonction plot  
>plot(XY.mat[,1],XY.mat[,2],pch=1,xlab="X",ylab="Y")  
>polygon(c(X.grid,0),c(sqrt(1-X.grid^2),0),density=10,col="red")
```

Comme démontré ci-dessus, l'approximation de Monte-Carlo présente des "bonnes propriétés". On a démontré également que la méthode de Monte-Carlo est avantageuse pour l'approximation des intégrales multiples. En effet, cette méthode est insensible à la dimension de l'intégrale.

En revanche, la méthode de Monte-Carlo est très concurrencée par les autres méthodes de calcul numérique d'intégrales notamment en ce qui concerne les intégrales simples à cause de la lenteur de sa vitesse de convergence.